

課題名 (タイトル) :

## 二次元強相関係の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名 : 曾田繁利

所属 : 計算科学研究機構量子系物質科学研究チーム

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

強相関量子系の量子ダイナミクスは、系の内部自由度が独自の集団的量子効果のため、基礎科学的興味のみならず、次世代の科学技術への応用の立場からも注目されている。このような強相関量子系の量子ダイナミクスを理解するためには、その内部自由度を精密に取り扱う必要があるため、平均場近似に基づく解析的な取り扱いが困難であり、数値的手法による取り扱いが重要であると考えられている。また、数値的取り扱いにおいても、系の巨大な内部自由度を取り扱う必要性から、十分な大きさの系を取り扱うためには巨大な計算資源が必要とされる。特に、系の内部自由度は系の大きさに対して指数関数的に増大するため、厳密対角化法による取り扱いも限定される。そこで、本研究課題では特に低次元強相関系に対して非常に有効な動的密度行列繰り込み群法を用いて強相関量子系の量子ダイナミクスを明らかにすることを目的とする。特に、本研究ではその計算コストの巨大さからほとんど計算例のない二次元強相関系を対象として取り扱い、第一目標として二次元量子スピン系について大規模計算による研究を行う。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、二次元強相関量子系の量子ダイナミクスの研究に対し、動的密度行列繰り込み群法を用いた計算を行った。密度行列繰り込み群法は、電子の多体問題を取り扱うため、系の自由度が系の大きさに対して指数関数的に増大する強相関量子系に対して、研究の目的となる状態のみを計算のターゲット状態として取り扱うことにより、必要とする計算精度に対してターゲット状態を適切に表現する任意の数の基底により計算を行う手法である。この密度行列繰り込み群法におけるターゲット状態を適切に表現する任意の数の基底の決定は、計算対象となる系を 2 つに分解しその間の量子ゆらぎを適切に取り込んだ数値繰り込みを行うことにより実現する。この密度行列繰り込み群法の利

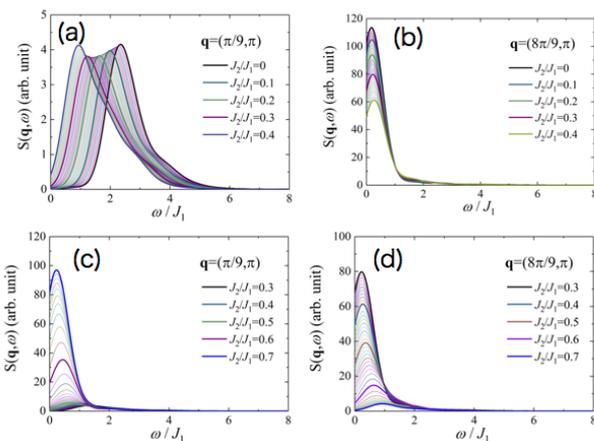
点は、厳密対角化において限界となる系の大きさを超えた計算が、ターゲット状態について厳密対角化に匹敵する計算精度で計算可能な点である。特に、二次元強相関量子系の基底状態の計算においては、この基底状態を精密に表現するために必要とされる基底の数が一般的な PC 上でも取り扱い可能な数でも十分な計算が可能であり、このような系を計算する上で最も効率的な計算手法のひとつと考えられている。この密度行列繰り込み群法は、基底状態のみではなく、励起ダイナミクスを取り扱う手法としても拡張されており、ここでは励起状態も精密に表現できるよう励起状態も同時にターゲット状態として取り扱う密度行列繰り込み群法の計算を行うことで可能となる。

さらに、密度行列繰り込み群法は一次元系のみではなく多次元系へ応用可能なアルゴリズムもいくつか提案されている。その一つは、通常の一次元系に用いられる密度行列繰り込み群法に、多次元系の格子形状を再現するような長距離相互作用を与えることにより実行される。しかしながら、密度行列繰り込み群法の多次元系への応用は一次元系での場合と比較して非常に巨大な計算コストが要求される。しかしながら、近年の計算機科学の発展により、二次元強相関量子系に対する密度行列繰り込み群法の適用は一般的となっており、その研究成果も次々と報告されている。さらに、最新のスーパーコンピュータを用いた場合には、動的密度行列繰り込み群法による二次元強相関量子系の励起ダイナミクスの取り扱いも可能となると考えられる。そこで本研究課題では、課題実施者が開発した大規模並列化された密度行列繰り込み群法を動的密度行列繰り込み群法として二次元強相関スピン系に適用した計算を実施した。

## 3. 結果

本研究では、反強磁性  $S=1/2$  ハイゼンベルク模型について、同じく反強磁性的な次近接ハイゼンベルク相互作用を導入した反強磁性  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルク模型について、動的密度行列繰り込み群法により、動的スピ

ン相関関数に対する計算を行った。次近接の反強磁性ハイゼンベルク相互作用の大きさ  $J_2$  をパラメータとして、次近接相互作用がゼロの正方格子の極限近傍では反強磁性スピン秩序を示し、最近接相互作用と次近接相互作用が等しい近傍では、スピンの正方格子の  $x$ 、または  $y$  方向にそろったストライプ構造を示す。さらに、その中間層では、絶対零度でもスピンが秩序を持たない量子スピン液体状態を示すことが知られている。そこで本研究では、この量子スピン液体相についてスピン・ギャップの有無等の解析を行うことが第一の目的である。特に、本研究で取り扱う反強磁性  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルク模型は、スピン・フラストレーションが生じる系であり、このような強相関量子系の計算手法として非常に強力な量子モンテカルロ法でいわゆる不符号問題のため計算が困難な系である。そこで、本研究では動的密度行列繰り込み群法によるこの系の動的スピン相関関数の計算を行う。しかしながら、二次元強相関系に対する動的密度行列繰り込み群法の適用は、非常に巨大な計算コストが要求されることが予想され、また、適用例もほとんど存在していない。そこで、本研究ではまず、十分な動的密度行列繰り込み群法における計算精度と、実際の計算が現実的な計算コストで実現可能か確認するため、厳密対角化による計算結果と比較しつつ、比較的小さなサイズの系からスタートし、その確認作業を進めた。図に本研究の計算例を示す。



図：8×8 サイト  $S=1/2$  反強磁性  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルク模型の動的スピン相関関数の計算結果。シリンダー境界条件( $x$  方向に開境界、 $y$  方向に周期的境界状態)。(a)と(b)は反強磁性相、(c)と(d)は量子スピン液体相が確認されているパラメータ領域からスピン・ストライプ秩序相の計算結果である。また、(a)

と(c)は  $q=(0, \pi)$  近傍、および(b)と(d)は  $q=(\pi, \pi)$  近傍の波数の結果を示す。

本研究の動的密度行列繰り込み群法による計算結果は、厳密対角化可能なサイズの系の結果と一致しており、これは、動的密度行列繰り込み群法の二次元強相関系への適用が十分可能であることを示している。その一方で、系の境界条件について、 $x$  方向、および  $y$  方向の両方について周期的境界条件を用いることは、密度行列繰り込み群法で一般的に知られている通り、その計算精度を確保することが非常に困難になることも確認された。そこで、本研究では他の二次元強相関量子系に対する密度行列繰り込み群法の適用と同様に  $y$  方向のみに周期的境界条件を用いたシリンダー状の境界条件を用いた計算を行うことが、計算コストとの両立という面からも適切であると考えられる。しかしながら、この系の基底状態の研究で指摘されている通り、系のサイズについて、本年度下期より開始した本研究の計算ではいまだ不十分であると考えられる。今後、より大きな系についての計算を進めることで、この系で示される各量子相についての励起ダイナミクスに対する解析を進めていきたい。

#### 4. まとめ

本研究課題では、 $S=1/2$  反強磁性  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルク模型のスピン励起ダイナミクスについて、動的密度行列繰り込み群法による解析を進めている。動的密度行列繰り込み群法による二次元強相関量子系の励起ダイナミクスの研究例は非常に限られており、これはこのような計算の実行のためには非常に巨大な計算コストが要求されるためである。そこで、本研究では大規模並列計算に対応した動的密度行列繰り込み群法による解析のため、まず厳密対角化による計算結果との比較により、計算精度と現実的な計算コストでの実行の可能性の確認を行った。厳密対角化による計算結果との比較では、計算結果の一致が確認され、また現実的な計算コストで二次元強相関量子系に対しても動的密度行列繰り込み群法による十分な精度の計算結果を得られることが確認された。

#### 5. 今後の計画・展望

本研究の現状の進捗状況としては、研究の目的であ

る  $S=1/2$  反強磁性  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルク模型について、特にこの系で現れる量子スピン液体状態に着目した励起ダイナミクスの研究のため、二次元強相関量子系、および大規模並列計算に対応した動的密度行列繰り込み群法の計算結果と有効性の確認が完了したところである。これまで本研究では、最大で  $8 \times 8 = 64$  サイトのシリンダー境界条件による計算により、現実的な計算コストで十分な計算精度の計算が可能であることが確かめられた。今後これまで得られた計算結果に加えてより大きな系での計算結果を得ることにより、この系の励起ダイナミクスの解析が可能になると考えられる。現在、より大きな系について計算を実行中であり、この系の励起ダイナミクスについての研究結果を学術論文等で報告する予定である。